TITLE:

スーパーコンピュータ"HITAC S-810"による拡散方程式の数値計算(スーパーコンピュータのための数値計算アルゴリズムの研究)

AUTHOR(S):

後, 保範; 桐野, 佳津子

CITATION:

後, 保範 ...[et al]. スーパーコンピュータ"HITAC S-810"による拡散方程式の数値計算(スーパーコンピュータのための数値計算アルゴリズムの研究). 数理解析研究所講究録 1987, 613: 12-27

ISSUE DATE:

1987-03

URL:

http://hdl.handle.net/2433/99802

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

数理解析研究所講究録
613巻 1987年 12-27

スーパーコンピュータ"HITAC S-810"による拡散方程式の数値計算

日立ソフト　後 保範 (Yasunori Ushiro)
梅野佳津子 (Kazuko Togano)

1. はじめに

科学技術計算は物理現象をいかに正確に数値シミュレーションするか，すなわち予測精度を実用に耐えるまでいかに向上させるかが課題である。解析対象は2次元モデルから3次元モデルへ，静的線形解析から動的非線形解析へ，一部分から全体へと大型化複雑化している。スーパーコンピュータ HITAC S-810はこのとき発生する大量の演算を高速処理することを目的として開発した。

高速演算を必要とする数値シミュレーションの多くは，偏微分方程式の数値解を得ることである。偏微分方程式は，差分法，有限要素法あるいは境界要素法などで離散化し行列の形へ変換する。その結果数値シミュレーションは連立一次方程式の計算又は固有値問題の計算に帰着する。この計算は大量データの記憶と高速演算を必要とする。

2. HITAC S-810の構成と特徴

HITAC S-810は，S-810/5, S-810/10，S-810/20 の3つのモデルでシリーズを形成している。 また下位のモデルから上位のモデルへは，設置場所で容易にフィールドアップできる。

HITAC S-810のプロセッサ仕様を表1に示す。

表1 S-810 プロセッサ 仕様

モデル			S-810/5	S-810/10	S-810/20
演算処理装置	最大性能		160 MFLOPS	315 MFLOPS	630 MFLOPS
演算処理装置	ベクトル命令数		80	80	83
演算処理装置	レジスタ	汎用レジスタ	16 (32ビット)		
演算処理装置	レジスタ	浮動小数点レジスタ	16 (64ビット)		
演算処理装置	レジスタ	ベクトルレジスタ	256語x16		256語x32
演算処理装置	レジスタ	ベクトルマスクレジスタ	256語x8		256語x8
演算処理装置	レジスタ	スカラレジスタ	16		32
演算処理装置	データ形式	固定小数点	32ビット		
演算処理装置	データ形式	浮動小数点	32, 64ビット		
演算処理装置	データ形式	論理	64ビット		
演算処理装置	条件付きベクトル処理		有		
演算処理装置	ベクトル処理用タイマ機構		有		
演算処理装置	バッファ記憶		256 KB		
演算処理装置	パイプライン	加算/論理	1	2	4
演算処理装置	パイプライン	乗算/加算	1	1	2
演算処理装置	パイプライン	乗除算/加算	1	1	2
演算処理装置	パイプライン	マスク演算	1	1	1
演算処理装置	パイプライン	ベクトルロード	1	2	6
演算処理装置	パイプライン	ベクトルストア	1	2	2
主記憶装置	容量		32, 64, 128MB		64, 128, 256MB
拡張記憶装置	容量		256〜1536MB 又は 512〜3,072MB		
拡張記憶装置	最大転送速度		500MB/秒 または 1000MB/秒		
入出力処理装置	チャネル数		8, 16, 24, 32		
入出力処理装置	最大転送速度		96MB/秒		

現在のスーパーコンピュータは高速処理能力を発揮するために様々な工夫がなされている。S-810も現在のスーパーコンピュータが持つ特徴は保持している。他のスーパーコンピュータと比較して，しいてS-810の特徴をあげれば次のようなものである。

(1) リストベクトルの性能がよい。

(2) 転送速度が従来のディスクの数百倍である拡張記憶装置がある。

3. 拡散方程式の数値計算上の特性

拡散方程式を離散化して得られる行列を非ゼロ要素の形で分類したものを図1に示す。境界要素法で離散化すると密行列となる。有限要素法及び差分法で離散化すると，通常はスパース行列になる。しかし，その行列を係数とする連立一次方程式の解法を考慮すると，有限要素法で離散化したものの多くは帯行列として扱う。行列の帯幅は一定の場合も，変化する場合もある。規則的なスパース行列は，解析対象領域を長方形又は直方体に写像し，差分法で離散化した場合に得られる。複雑な解析対象領域を有限要素法で離散化すると，不規則的なスパース行列となる。拡散方程式の数値解析の場合，多くは各種方法で連立一次方程式を作成し，これを係数とする連立一次方程式の解を得ることに帰着される。最近は高速な反復解法が使用できるようになったので，連立一次方程

式を解くよりも，行列を作成する方に時間がかかる場合も多い。しかし，離散化するところまで取りあげると紙面の都合上，長くなりすぎるので，ここでは拡散方程式を離散化して発生する行列を係数とする連立一次方程式について主に述べる。

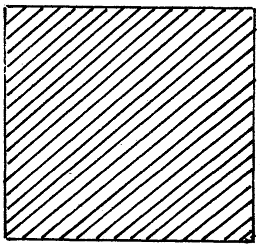
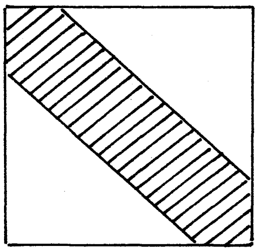
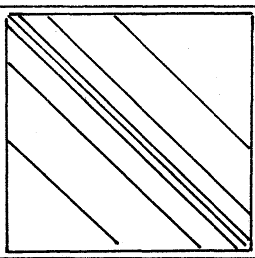
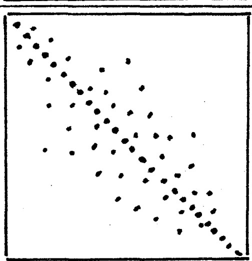
項番	行列の形	代表的離散化手法	連立一次方程式の代表的解法
1	密行列 	境界要素法	ガウス消去法 改訂コレスキー法
2	帯行列 	有限要素法	ガウス消去法 改訂コレスキー法
3	規則的スパース行列 	差分法	SOR法 ICCG法 SCG法 ILUBCG法
4	不規則的スパース行列 	有限要素法	SOR法 ICCG法 SCG法 ILUBCG法

図1　拡散方程式から発生する行列の形

4. 拡張記憶を使用した大次元行列の解法

S-810の拡張記憶装置は通常のディスクと同様にファイルに対してREAD, WRITEが可能である。このため同一のプログラムで拡張記憶装置でもディスクでも自由に使用できる。

連立一次方程式をS-810/20を使用し，入出力を使用して解いた場合，拡張記憶装置とディスク（H-8598）を使用した場合の処理時間の差の一例を表2に示す。

（S-810/20で測定）

表2. 拡張記憶装置とディスクを使用した場合の処理時間の差

連立一次方程式の解法	データの分割数	測定時間	拡張記憶ⓐを使用	ディスクⓑ (H-8598)を使用	倍率 ⓑ/ⓐ
非対称密行列のガウス消去法 (2000次元)	7	CPU	14秒	20秒	1.4
		経過	14秒	164	12
対称帯行列のガウス消去法 (7000次元, 帯半幅：350)	7	CPU	3.1秒	4.7	1.5
		経過	3.2秒	42	13
スカイライン法 (7752次元, プロファイル数:16 44418)	7	CPU	3.5秒	5.5	1.6
		経過	3.5秒	42	12

（シングルジョブで測定）

表2からわかるよう連立一次方程式を解く場合は入出力1回に対し数十～数百回の演算を行うため，拡張記憶装置とディスクでの経過時間の比は約1桁程度である。これに対し，線形非定常問題や

逆反復計算による固有値計算を取り扱う場合は，前進後退代入の部分が主力となり，入力一回に対し演算は乗算と，加算が各一回となり，入出力のスピード差が大きく現れる。

例として帯半幅350で7000次元の対称帯行列となる線形拡散方程式の問題を500ステップ計算した場合のCPU時間と経過時間は次のようになる。（S-810/20を使用したシングルラン）

拡張記憶を使用のとき，　CPU時間 105秒，経過時間 106秒

ディスク(H-8589)を使用のとき，　CPU時間 454秒，経過時間 9400秒

この場合拡張記憶を使用するとCPU時間も4.5倍向上し，経過時間は約2桁向上する。

このようにS-810で拡張記憶装置を使用すると，一回の入出力で演算量の多い場合で約1桁，演算量が少い場合は約2桁，ディスクに対して経過時間が短縮される。

このように拡張記憶の効果は非常に大きく，今後スーパーコンピュータを使用するには必須のものとなるであろう。

4. 差分法で離散化した大次元の行列の解法

拡散方程式を差分法で離散化した行列を係数とする連立一次方程式の解法として現在，対称行列の場合はMICCG法[1]が，(Modified Incomplete Cholesky Conjugate Gradient Method)，非対称行列の場合には，CR法(Conjugate Residual Method)，BCG法(Bi-Conjugate Gradient Method)及びCGS法(Conjuga te Gradient Squared Method）に不完全三角分解（ILU；Incomplete LU Decomposition）を付けた解法[2]が注目されてきている。

規則的対称疎行列を係数とするMICCG法は収束は速いがベクトル計算機向きにするには工夫がいる。このため(M)ICCG法をベクトル計算機向きにするためのアルゴリズムの検討が種々なされてきた。しかしそれらのほとんどのアルゴリズムは元の(M)ICCG法より収束速度が低下するという傾向があった。

ここ数年，収束速度を低下させないベクトル計算機向き(M)ICCG法を検討してきた[1]。その結果リストベクトルを使用すると同一な収束速度を保ったままベクトル化することが分かった。また一方ではMICCG法よりは収束速度は低下してもベクトル計算機の性能を十分に~~発~~揮させることによりトータルの性能でMICCG法に対抗しようとする方法も検討されている。その代表がSCG法[3]（Scaled Conjugate Gradient Method）である。

リストベクトルを使用したMICCG法とSCG法の性能をベクトル計算機上で単純に比較することはできない。取り扱う問題によっても，ベクトル計算機の特性によっても比較結果が異なるためである。しかし，ここではあえてS-810/20という特定の計算機で，また限られた問題のレパートリの中で比較する。S-810/20は他のベクトル計算機に比較して相対的にリストベクトル処理が速いため，ここでの比較結果は他のベクトル計算機によるとリスト付

MICCG法を平均以上に高く評価している可能性はある。

収束の速さの比較には(1)式に示す三次元拡散方程式を中央差分で離散化して得られる行列を使用した。計算対象領域は直方体領域の左下奥1/8領域である。全体領域の表面は0に固定した境界(Γ_1)とし，1/8領域への切断面は拡散による移動のない境界(Γ_2)とする。拡散係数と形状の収束性への影響を考慮して計算対象モデルは図2に示すCASE-A, CASE-B, CASE-C及びCASE-Dの4種類のモデルを選定した。各モデルは直方体領域の1/8領域に対応するもので境界条件はすべて同一とする。

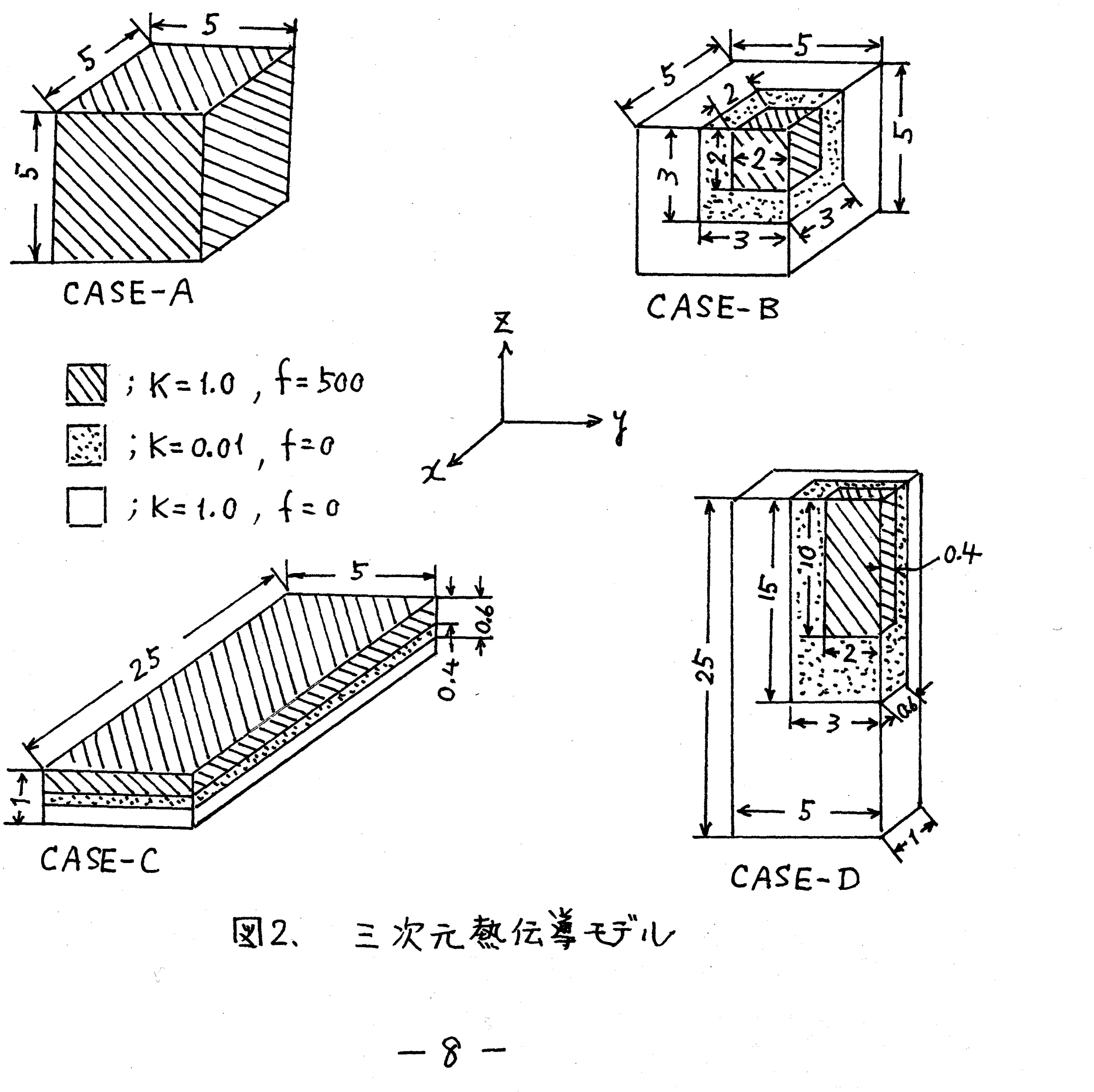


図2、 三次元熱伝導モデル

各モデルとも下記の拡散方程式及び境界条件に従う.

$$-\mathrm{div}(K\cdot \mathrm{grad}\,\phi) = f \qquad (1)$$

$$\left.\begin{array}{ll} \phi = 0 & \text{on } \Gamma_1 \\ (K\cdot \mathrm{grad}\,\phi)\cdot n = 0 & \text{on } \Gamma_2 \end{array}\right\} \text{境界条件} \qquad (2)$$

各モデルとも40×40×40に等分割し,中央差分公式を使用して64000次元の次のような連立一次方程式を作成する。
未知数となる節点の番号はx方向,y方向,z方向の順に付けた,x^{ν}をν回反復計算時の解ベクトルとするとき,解の収束を判定する基準として次式で表現される二乗ノルムの相対残差を使用した。

$$\text{相対残差} = \frac{\| Ax^{\nu} - b \|_2}{\| b \|_2} \leq 10^{-8} \qquad (3)$$

S-810/20におけるMICCG法,ICCG法とSCG法の比較を表3に示す

表3. S-810/20における各反復解法の比較

解法 \ CASE	MICCG法 (a) CPU時間 (S)	MICCG法 (a) 反復回数	ICCG法 (b) CPU時間 (S)	ICCG法 (b) 反復回数	ICCG法 (b) 比 (b)/(a)	SCG法 (c) CPU時間 (S)	SCG法 (c) 反復回数	SCG法 (c) 比 (c)/(a)
A	0.59	33	1.12	64	1.9	1.13	196	1.9
B	0.63	35	1.18	67	1.9	1.21	206	1.9
C	1.57	89	3.47	198	2.2	7.51	1279	4.8
D	1.07	61	2.08	118	1.9	4.38	742	4.0

反復計算の初期値は$(0,0,0,\cdots,0)^T$なるゼロベクトルとした。MICCG法は参考文献(1) P8の方式1を採用し，加速パラメータは$\alpha=0.975$に固定した。表2によれば，リストベクトルを使用したMICCG法が全面的に有利である。しかしこの結果は使用したベクトル計算機とモデルに大きく依存する。またプログラムの作成方法にも依存する。例えばSCG法のプログラムを作成するとき，ICCG法のプログラムをSCG法に単純に置き換えたのと，SCG法向きに修正しなおしたのでは約2割SCG法向きに修正した方が速くなった。ここでの数値は一応SCG向きに修正したものの値である。

6　有限要素法で離散化した場合の解法

拡散方程式を有限要素法で離散化した行列を係数とする連立一次方程式の解法としては，帯行列のガウス消去法，スカイライン法及び差分法を離散化した場合に使用したのと同様な反復解法がある。帯行列のガウス消去法やスカイライン法を使用するとき，大次元の問題の場合はこの部分の処理時間がほとんどを占めるため，この部分の処理時間の短縮が最も重要である。この解法部分を高速化するためには拡張記憶装置の使用が非常に有効である。

一方有限要素法で離散化した不規則的疎行列が非常に疎な場合には差分法で使用したのと同様な反復解法が使用できる。行列が正値対称行列の場合にはICCG法が有効であり，これ

も，リストベクトルを上手に利用するとベクトル計算機向き解法になる。有限要素法の場合，差分法に比較して，方程式を離散化して連立一次方程式を作成する部分に処理時間がかかる。特に連立一次方程式の解法にICCG法を使用した場合には大次元行列の場合でも離散化部分の方により多くの時間ががかかる場合がある。

ここでは一例を選んで数値解析全体をベクトル化した場合の例[4]を述べる。解析対象として融解や凝固を伴う伝熱解析を選んだ。融解や凝固を伴う伝熱解析は熱収支条件（ステファン条件）と拡散方程式で数式表現されるが，実用上は拡散方程式だけでも計算できる。この場合相変化の潜熱はエンタルピーの変化に現れ，計算は熱容量の変化で吸収する。

図3はレーザー光線の照射を受けシリコンが融解してさらに凝固していくときの伝熱解析の例である。これは(4)式の拡散方程式で熱容量 $\rho(u)$ と熱伝導係数 $k(u)$ を温度 u に依存させて計算できる。

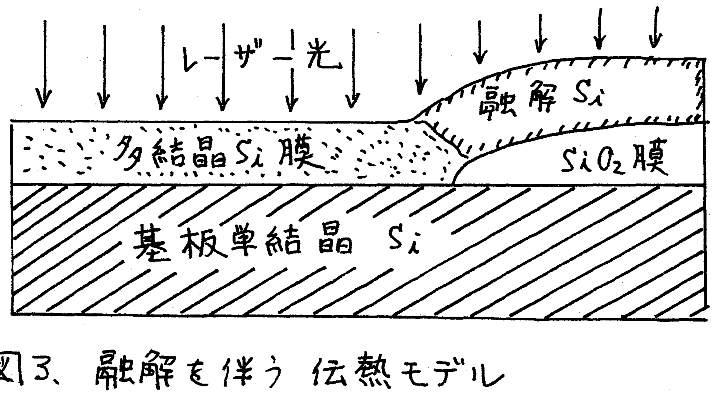


図3、融解を伴う伝熱モデル

$$\rho(u)\frac{\partial u}{\partial t} - div\,(k(u)\,grad(u)) = f(t) \qquad (4)$$

(4)式の拡散方程式を有限要素法で離散化して計算する手順を図3に示す。

データの入力
有限要素分割
Δtきざみで指定時間まで以下を繰返す

(a) 各要素の$\rho(u)$, $k(u)$の値の計算
(b) 有限要素法で要素行列作成
(c) 連立常微分方程式の係数行列の作成
$$M\dot{u} + Ku = f$$
(d) 連立一次方程式の係数行列の作成
(e) 連立一次方程式の解の計算（ICCG法）
(f) 指定時間であれば結果の出力

図3. 有限要素法における計算手順

図3の(a)から(e)までの計算をベクトル処理で高速化するには汎用機と異なった工夫がいる。その要点を示すと次のようになる。工夫すべき項目の項番は図3の(a)から(e)にそれぞれ対応する。

(a) ベクトル長を長くする工夫及び区間検索をベクトル化する工夫が必要

(b) 最内側のDOループを要素数で回すことによるベクトル長を長くする工夫が必要

(c) 同一節点を共有しない単位に要素のグループを作成し，その要素番号をリストに記憶させておき，データの独立が保てる工夫をして，リストベクトルを上手に使用してベクトル化する工夫が必要。

(d)　ベクトル長を行列の次元数まで長くする工夫が必要。

(e)　次の条件を満足するようにリストベクトルを作成すると

ICCG法の収束率をスカラ用と変えないでベクトル化することができる。

(i)　直接結合する節点の番号の大小関係はオリジナルの番号と変更後の番号で一致させる。

(ii)　連続する接点の番号ができるだけ結合しないように番号を変更する。

(a)から(e)の対策を行うとHITAC S-810/20を用いて図3のモデルの計算を行ったところHITAC M-280Hの約30倍高速演算できた。このときの節点数は約5000，時間方向のきざみ回数は200である。

7、偏微分方程式向き言語DEQSOLの概要。

DEQSOLは数値シミュレーション用に設計した高水準の問題向きプログラミング言語である。その特長として，アルゴリズムと計算スキームならびに領域形状の簡潔な記述と各種解法への柔軟な適応及び並列化アルゴリズムの自然な記述が可能である。

(a)　アルゴリズムと計算スキームの簡潔な記述

偏微分方程式で表わされる物理現象はほとんどそのまま偏微分方程式の形で記述できます。たとえば偏微分方程式の一般的な記法である、

$$-div(A\cdot grad(u)) + v\cdot grad(u) = f \qquad (5)$$

はDEQSOLでは次のように簡潔度においてはほとんど差がなく記述できる。

$$-DIV(A..GRAD(U))+V..GRAD(U)=F \qquad (6)$$

記述された方程式は自動的に差分法や有限要素法で離散化され計算される。数値シミュレーション対象の領域形状，メッシュ分割，境界条件及び初期条件も簡潔に記述できる。結果としてDEQSOLでの記述行数は同じ問題に対するFORTRANソースプログラムの記述行数と比べると約十分の一となる。また記述が簡単で，複雑な離散化や数値解法はDEQSOLが自動的に処理するため，数値解析の専門化でなくても容易に数値シミュレーションプログラムが作成でき，プログラミング上のミスも少なくなる。

(b) 各種解法への柔軟な適応

DEQSOLは単に解法ルーチンの名称を指定して計算するのとは異なり，解法ブロックにて実行文を任意に組み合わせて解法を記述する方式を採用しているため，各種の問題への柔軟な適応が図れる。データ操作のためには代入文とソルブ文の二種類を置き，陽解法，陰解法，及び準陰解法の種々のスキームに対応できるように配慮している。また時間依存問題や非線形問題の反復計算のため繰り返しブロック文を置き計算制御

が容易にできるようになっている。

(C) 並列化アルゴリズムの自然な記述

偏微分方程式で表わされる物理現象をシミュレーションするプログラムは高い並列性を内在している。しかしこの並列性を有効に利用したプログラムを作成するには，高度な数値計算手法とスーパーコンピュータ・アーキテクチャを知る必要がある。DEQSOLでは自動的に，この並列性を生かしたFORTRANソースプログラムの生成及び行列解法ルーチンを用意しているためスーパーコンピュータの性能を十分に発揮することができる。

DEQSOLの主な適用分野は次の通りである。

(i) 熱伝導解析

静止又は動作している物体及び流れを伴う場の定常及び非定常解析

(ii) 電磁場解析

静止又は動作している物体の電位分布及び磁場分布の定常及び非定常の解析

(iii) 拡散解析

不純物及び中性子の定常，非定常の拡散と汚染解析

(iv) 半導体デバイス解析

半導体内の電子，正孔，イオンの変化による電圧，電流特性の解析

(v) 流体解析

完全流体及びレイノルズ数の低い流れの解析，浸透流解析。

8 おわりに

スーパーコンピュータ HITAC S-810での拡散方程式の処理について述べたが，スーパーコンピュータの応用分野ははるかに広い。今後スーパーコンピュータによる数値シミュレーションが多くの分野で有効に使用されるためにはスーパーコンピュータの性能向上を図るだけでなく，FORTRANによる高度な自動ベクトル化，スーパーコンピュータ向き解法の開発及びベクトル化版汎用パッケージの充実が必要である。しかし，取り扱うモデルがどんどん拡張している現在では汎用パッケージでは十分解析できない問題も多い。これらの問題をFORTRANだけで記述するのは効率も悪いし高度な技術が必要となる。このためFORTRANよりさらに高級な言語が必要である。その一つの試みとして偏微分方程式向き言語 DEQSOLを開発した。DEQSOLはまだ適用範囲がせまいが，より広い範囲の問題が簡潔に記述できる超高級言語でスーパーコンピュータを意識しないで，その時点のスーパーコンピュータの性能を十分に発揮できるものが今後ぜひ必要だと考える。

9. 参考文献

1) 後；ベクトル計算機向きICCG法，京大数理解析講究録 514，PP 110～134 (1984)

2) 後；移流拡散方程式に対するベクトル計算機向きPCG法，京大数理解析講究録 548，PP147～160 (1985)

3) 速水，原田；ベクトル計算機におけるScaled CG法の有効性について，情報処理学会，数値解析 17-4 (1986)

4) 後；スーパーコンピュータ"HITAC S-810"による拡散方程式の有限要素解析 電子通信学会全国大会，PP 7-229～7-230 (1984)